

# Examen de simulación

## Análisis de Sistemas

### Resumen

Este es el enunciado del examen de simulación del curso de Análisis de Sistemas. Se presenta el sistema que se quiere implementar, las instrucciones del examen y la evaluación.

## 1. Sistema por implementar

Es muy común que las reacciones bioquímicas se modelen como modelos en variables de estado. Para ello, se utiliza la Ley de conservación de la masa y los conceptos de estequiometría y velocidades de reacción. Los sistemas biológicos son muy importantes en aplicaciones como plantas de procesamiento de aguas y sistemas de generación de metano a partir de biodigestión. Para esta prueba, se deberá implementar un bioreactor bifásico para la degradación de xenobióticos. Para ello se utilizará el modelo propuesto por Cruickshank, Daugulis y McLellan<sup>1</sup>. Este sistema de dos fases ha sido usado de manera exitosa para la biodegradación del fenol.

El modelo de la degradación depende de cuatro variables fundamentales: la concentración de bacterias en la fase acuosa  $X$  ( $\text{g L}^{-1}$ ), la concentración de fenol en la fase acuosa  $S_{aq}$  ( $\text{g L}^{-1}$ ), la concentración de fenol en la fase orgánica  $S_{org}$  ( $\text{g L}^{-1}$ ) y la concentración de oxígeno  $C_{O_2}$  ( $\text{g L}^{-1}$ ). La idea es que las bacterias consuman el fenol y el oxígeno, de manera que aumente la cantidad de bacterias mientras eliminan el fenol de la mezcla en el reactor. El reactor se airea (es decir, se le introduce activamente oxígeno) para promover el crecimiento de estas bacterias. La dinámica de estas variables se puede representar con el siguiente modelo:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - k_d X - k_e \mu X - D_{aq} X \quad (1)$$

$$\frac{dS_{aq}}{dt} = K_L a \left( \frac{S_{org}}{D_{phenol}} - S_{aq} \right) - \frac{\mu X}{Y_{x/s}} - D_{aq} S_{aq} \quad (2)$$

$$\frac{dS_{org}}{dt} = D_s S_{org,o} - K_L a \left( \frac{S_{org}}{D_{phenol}} - S_{aq} \right) \frac{V_{aq}}{V_{org}} - D_s S_{org} \quad (3)$$

$$\frac{dC_{O_2}}{dt} = D_{aq} C_{O_2} + K_L a_{O_2} (C_{O_2}^* - C_{O_2}) - Y_{O_2/x} \mu X - D_{aq} C_{O_2} \quad (4)$$

donde  $\mu$  es la tasa de crecimiento específico de las bacterias ( $\text{h}^{-1}$ ) que se calcula mediante:

$$\mu = \frac{\mu_{max} S_{aq}}{K_S + S_{aq} + (S_{aq}^2/K_I)} \frac{C_{O_2}}{K_O + C_{O_2}} \quad (5)$$

---

<sup>1</sup>Cruickshank, S. M., Daugulis, A. J., & McLellan, P. J. (2000). Modelling of a continuous two-phase partitioning bioreactor for the degradation of xenobiotics. *Process Biochemistry*, 35(9), 1027–1035. [https://doi.org/10.1016/S0032-9592\(00\)00139-4](https://doi.org/10.1016/S0032-9592(00)00139-4)

Cuadro 1: Parámetros del modelo		
Parámetro	Valor	Unidad
$k_d$	0,001	$\text{h}^{-1}$
$k_e$	0,57	-
$K_I$	$470 \times 10^{-3}$	$\text{g L}^{-1}$
$K_L a$	250	$\text{h}^{-1}$
$k_L a_{O_2}$	43	$\text{h}^{-1}$
$K_O$	$0,048 \times 10^{-3}$	$\text{g L}^{-1}$
$K_S$	$1,0 \times 10^{-3} 1,0$	$\text{g L}^{-1}$
$V_{\text{aq}}$	1,0	L
$V_{\text{org}}$	0,5	L
$Y_{O_2/x}$	1/0,338	g/g
$Y_{x/s}$	0,52	g/g
$\mu_{\text{max}}$	0,534	$\text{h}^{-1}$
$C_{O_2}^*$	$37,3 \times 10^{-3}$	$\text{g L}^{-1}$

y el coeficiente de partición de fenol entre el solvente y el medio de crecimiento acuoso viene dado por:

$$D_{\text{phenol}} = 1,215(9,75e^{-1,8182 \cdot S_{\text{org}}} - 48,75e^{-6,6667 \cdot S_{\text{org}}} + 39,0) \quad (6)$$

Los parámetros y variables se explican en el Cuadro 1. Cuando se utiliza de manera continua, hay tres variables que se pueden utilizar para manipular el sistema: la concentración del substrato de entrada  $S_{\text{org},o}$  ( $\text{g L}^{-1}$ ), la velocidad de dilución acuosa  $D_{\text{aq}}$  ( $\text{h}^{-1}$ ) y la velocidad de dilución del solvente  $D_S$  ( $\text{h}^{-1}$ ).

## 2. Instrucciones

Tomando en cuenta el artículo donde se presenta el modelo, el trabajo que se propone es intentar replicar la figura 6 del artículo utilizando dos formas distintas de implementar el modelo. Las posibles formas de implementarlo son:

- Usando la función ode45 en MATLAB.
- Usando bloques básicos en Simulink.
- Implementando un S-function para Simulink.

Entonces, debe elegir dos manera de implementar el modelo de forma que se obtengan **los mismos resultados con ambas implementaciones**.

El resultado que se espera es que se presente una figura con resultados bastante cercanos a los de la figura 6 del artículo, comparando los resultados de ambas implementaciones.

El punto de operación del sistema es:

$$\begin{aligned}X(0) &= 0,4225 \\S_{\text{aq}}(0) &= 0,0415 \\S_{\text{org}}(0) &= 2,0535 \\C_{O_2}(0) &= 0,0234 \\S_{\text{org,o}} &= 3,5 \\D_{\text{aq}} &= 0,205 \\D_S &= 0,55\end{aligned}$$

La simulación en la figura 6 corresponde al caso en que se hace un cambio de  $\pm 0,2 \text{ g L}^{-1}$  en  $S_{\text{org,o}}$  en  $t = 0 \text{ s}$ .

### 3. Evaluación

El entregable será:

- Un documento con una breve explicación del trabajo realizado.
- Dentro del mismo documento, se debe presentar la figura obtenida con ambas implementaciones y comentarla.
- En el mismo documento, una explicación breve de los pasos para ejecutar el código (o modelos de Simulink o ambos).
- El código (o modelo de Simulink o ambos) donde se puede verificar el resultado.

Esta será la evaluación:

Criterio	Nota
Dos implementaciones que dan igual con resultados correctos	100 %
Una implementación tiene resultados correctos y la otra no	80 %
Solo se presenta una implementación y esta tiene resultados correctos	60 %
Dos implementaciones que corren pero con resultados incorrectos (aunque den iguales)	40 %
Solo una implementación con resultados incorrectos	20 %
No se presenta ninguna implementación	0 %

Si alguna de las implementaciones no se puede ejecutar, se considerará como no presentada.